

Metodi multistep: BDF e sistemi stiff

Giacomo Tombolan Valerio Nappi Lorenzo Rossi
Marco Manganini Mirko Seghezzi

27/05/2020

Bibliografia

- [1] Quarteroni A., Saleri F. and Gervasio P.
Calcolo Scientifico: Esercizi e problemi risolti con MATLAB e Octave.
UNITEXT. Springer Milan, 2012.
- [2] Ascher Uri M. and Petzold Linda R.
Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations.
Siam, 1998.
- [3] Robertson H. H. "The Solution of a Set of Reaction Rate Equations"
in: Walsh J. (ed.), *Numerical Analysis. An Introduction based on a Symposium Organized by the Institute of Mathematics and its Applications.*
Academic Press, 1972. pp 178-182
- [4] Gear B.
Backward Differentiation Formulas (Scholarpedia)
http://www.scholarpedia.org/article/Backward_differentiation_formulas

Sommario

Introduzione a sistemi stiff e metodi BDF

Analisi del circuito RLC

Cosa sono i sistemi Stiff?

BDF

Problema del Priming

Zero stabilità e convergenza

Ordine e consistenza

Assoluta stabilità

Stiff decay

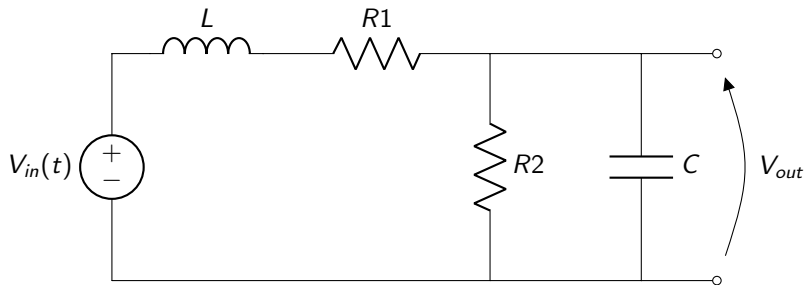
Circuito RLC: soluzioni con BDF

Introduzione a sistemi stiff e metodi BDF

- ▶ I sistemi stiff sono problemi molto comuni nel campo dell'elettronica.
- ▶ Analizzeremo dei metodi per risolverli efficacemente
- ▶ Ma prima di dare definizioni...

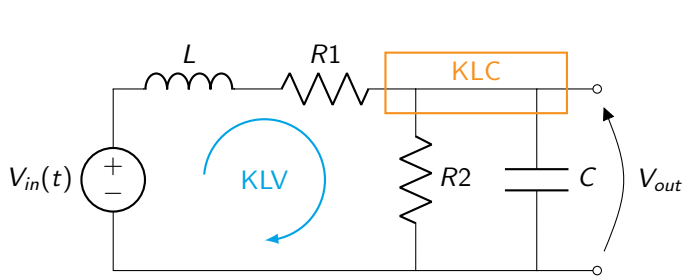
Circuito RLC

Si supponga di prendere in esame il seguente circuito, con l'obiettivo di calcolarne la tensione di uscita V_{out} considerando uno scalino ritardato in ingresso, di ampiezza V_{in}



Analisi del circuito RLC

Analizziamo il circuito attraverso la legge di Kirchhoff delle correnti e quella delle tensioni.
Prendiamo in considerazione la maglia **azzurra** e il nodo **arancione**.



$$\begin{cases} \text{KLV} : V_{in} = V_L + V_{R1} + V_{out} \\ \text{KLC} : I_{in} = I_{R2} + I_C \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 = V_{out} \\ x_2 = I_{in} \end{cases}$$

Otteniamo il sistema:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -\frac{1}{L}x_1 - \frac{R_1}{L}x_2 + \frac{1}{L}V_{in} \\ \dot{x}_2 = -\frac{1}{R_2C}x_1 + \frac{1}{C}x_2 \end{cases}$$

Analisi del circuito RLC: rappresentazione matriciale

Possiamo riscrivere il sistema ottenuto come matrice:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{L} & -\frac{R_1}{L} \\ 1 & +\frac{1}{C} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{1}{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ V_{in} \end{bmatrix}$$

Prendiamo in considerazione la matrice dei coefficienti del sistema:

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{L} & -\frac{R_1}{L} \\ 1 & +\frac{1}{C} \end{bmatrix}$$

Analisi del circuito RLC: gli autovalori

- Dagli autovalori di questa matrice discendono importanti proprietà del sistema:

$$\text{eig}(A) \Rightarrow \left| \begin{array}{cc} -\frac{1}{L} - \lambda & -\frac{R_1}{L} \\ -\frac{1}{R_2 C} & +\frac{1}{C} - \lambda \end{array} \right| = 0$$

$$\lambda_{1,2} = -\frac{L \pm \sqrt{(CR_1R_2 - L)^2 - 4CLR_2^2} + CR_1R_2}{2CLR_2}$$

- La soluzione libera del sistema sarà una combinazione lineare dei **modi** del sistema: $e^{\lambda_n t}$
- Per λ positivi il sistema diverge per $t \rightarrow \infty$. Chiediamo quindi autovalori con $\text{Re}(\lambda) < 0$
- La soluzione è dominata dall'autovalore **più piccolo**, che individua il polo dominante.
- Numericamente non possiamo permetterci di trascurare gli altri autovalori.

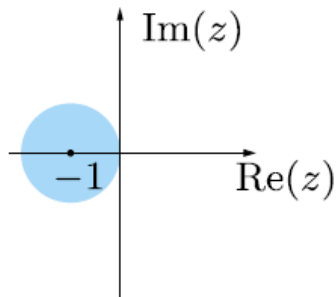
Assoluta stabilità

Dagli autovalori dipende inoltre la stabilità della risoluzione numerica.

Come visto a lezione, con il metodo di Eulero esplicito abbiamo assoluta stabilità se

$|1 + h\lambda| < 1$, con h passo di discretizzazione della variabile indipendente

Dovremo quindi scegliere un passo h tale che la relazione sia soddisfatta per **tutti** gli autovalori



Osserviamo poi che per autovalori reali, la relazione si riduce a:

$$-2 < h\lambda_n < 0 \quad \forall n$$

O in modulo, assunto $\lambda < 0$:

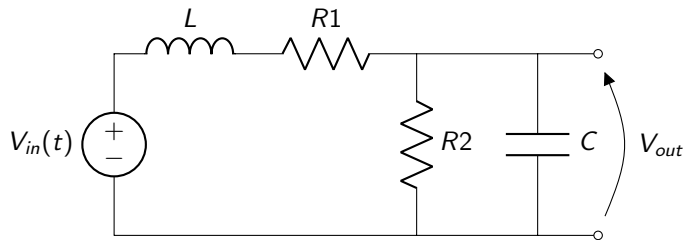
$$|h\lambda_n| < 2 \quad \forall n$$

Cosa sono i sistemi Stiff?

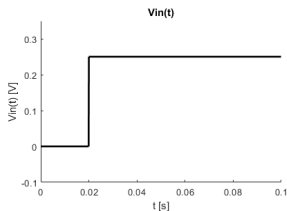
- ▶ Sono sistemi caratterizzati da modi (autovalori) distanti di molti ordini di grandezza tra di loro.
- ▶ Più è grande la differenza tra la componente più lenta e la più veloce, più il sistema è stiff.
- ▶ La stiffness è una proprietà associata al sistema sotto analisi

Esempio: circuito RLC **non** stiff

Si supponga di prendere in esame il seguente circuito, con l'obiettivo di calcolarne la tensione di uscita $V_{out}(t)$ considerando un generatore di tensione forzante V_{in}



$$\begin{cases} L = 67 \text{ mH} \\ C = 760 \text{ } \mu\text{F} \\ R_1 = 20 \text{ } \Omega \\ R_2 = 1 \text{ k}\Omega \\ V_{in} = V_u(t - 0.02) \end{cases}$$

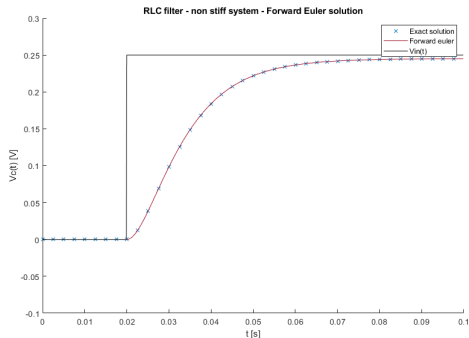


$$\begin{cases} \lambda_1 = -100 \\ \lambda_2 = -200 \end{cases}$$

Esempio: circuito RLC **non** stiff - soluzione

Il valore di $V_{out}(t)$ è facilmente calcolato usando, ad esempio, un metodo esplicito (Eulero in avanti).

È necessario scegliere un passo di discretizzazione h che soddisfi la relazione $|h\lambda_n| < 2$



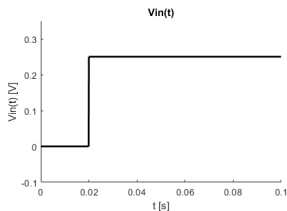
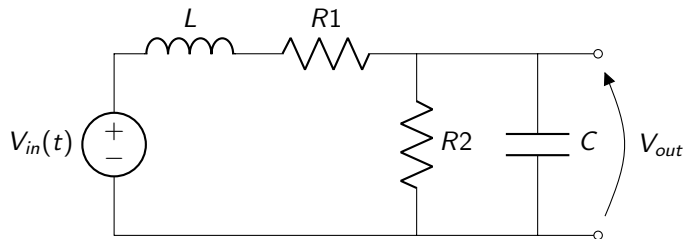
- Dobbiamo soddisfare la condizione più stringente: $|h\lambda_2| < 2$

$$h < \frac{1}{100}$$

- Valutando il sistema per $t \in [0, 0.1]$ dovremo eseguire **più di 10 passi**.
- La condizione è facilmente soddisfatta, scegliamo infatti di eseguire 100 passi per avere un numero apprezzabile di punti.

Esempio: circuito RLC stiff

Cambiando il valore dei componenti, il sistema dà origine ad autovalori differenti tra di loro di parecchi ordini di grandezza

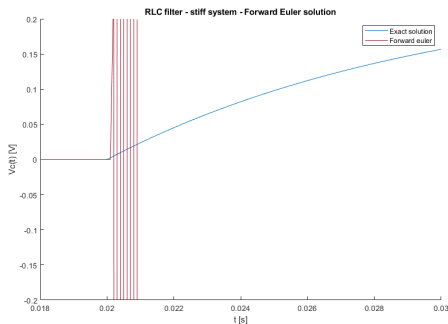


$$\begin{cases} L = 20 \mu H \\ C = 500 \mu F \\ R_1 = 20 \Omega \\ R_2 = 1 k\Omega \\ V_{in} = V_u(t - 0.02) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \lambda_1 = -100 \\ \lambda_2 = -1000000 \end{cases}$$

Circuito RLC con eulero in avanti

Se volessimo risolvere il nuovo sistema **stiff**, dovremmo considerare un passo h molto più piccolo



Considerando lo stesso h utilizzato prima, considerando solo l'autovalore dominante, la soluzione diverge molto velocemente

- Dovremo soddisfare la relazione $|h\lambda_2| < 2$

$$h < \frac{1}{500000}$$

- Questa scelta di h implicherebbe una esecuzione di oltre **50000** passi
- Con 100000 passi, il tempo di simulazione da noi registrato è pari a circa 2.5 secondi
- Ci servono nuovi metodi: BDF

Backward Differentiation Formulas (BDF)

- ▶ **Linear Multistep Methods (LMM)**: la valutazione n -esima dipende dalla storia passata delle valutazioni e dalla valutazione della f a passo n -esimo.

Vantaggi:

- ▶ Migliore accuratezza rispetto ad altri metodi (es. RK) a parità di numero di valutazioni della funzione
- ▶ Metodi costruiti più semplici e performanti in fatto di ordine e stima dell'errore
- ▶ Proprietà di stiff decay

Svantaggi:

- ▶ Necessità di condizioni iniziali accurate: alto costo computazionale di partenza
- ▶ Flessibilità minore per avere adattività di ordine e di passo di integrazione
- ▶ Per metodi multistep: zero stabilità da determinare (gli one step hanno la zero stabilità garantita dalla consistenza)

Costruiamo BDF

Dato il problema di Cauchy $y' = f(t, y)$

- costruiamo l'interpolante $\varphi(t)$ della soluzione y

$$y(t) \approx \varphi(t) = y(t_n) + (t - t_n) \frac{y(t_n) - y(t_{n-1})}{t_n - t_{n-1}}$$

- la deriviamo e la poniamo uguale a $f(t, y)$

$$y'(t) \approx \varphi'(t) = \frac{y(t_n) - y(t_{n-1})}{t_n - t_{n-1}} = \frac{y(t_n) - y(t_{n-1})}{h} = f(t_n, y_n)$$

- Più in generale, per ordini superiori al primo, possiamo scrivere:

$$f(t_n, y_n) = \frac{1}{\beta_0} \frac{\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n-j}}{h} \quad \sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n-j} = h \beta_0 f(t_n, y_n)$$

- Espandiamo ora coefficienti ed equazioni

BDF (II)

► **Caso più semplice di BDF** : Eulero implicito (BDF1)

<i>BDF</i>	β_0	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6
<i>BDF1</i>	1	1	-1					
<i>BDF2</i>	$2/3$	1	$4/3$	$1/3$				
<i>BDF3</i>	$6/11$	1	$-18/11$	$9/11$	$-2/11$			
<i>BDF4</i>	$12/25$	1	$-48/25$	$36/25$	$-16/25$	$3/25$		
<i>BDF5</i>	$60/137$	1	$300/137$	$300/137$	$-200/137$	$75/137$	$-12/137$	
<i>BDF6</i>	$60/147$	1	$-360/147$	$450/147$	$-400/147$	$225/147$	$72/147$	$10/147$

BDF (III)

► La tabella può essere meglio visualizzata scrivendo le equazioni α_j e β_0 :

$$\text{BDF1} \quad y_n = y_{n-1} + hf(t_n, y_n) \rightarrow y_n = -\alpha_1 y_{n-1} + \beta_0 hf(t_n, y_n)$$

$$\text{BDF2} \quad y_n = \frac{4}{3}y_{n-1} - \frac{1}{3}y_{n-2} + \frac{2}{3}hf(t_n, y_n) \rightarrow y_n = -\alpha_1 y_{n-1} - \alpha_2 y_{n-2} + \beta_0 hf(t_n, y_n)$$

$$\text{BDF3} \quad \dots$$

$$\text{BDF4} \quad \dots$$

$$\text{BDF5} \quad \dots$$

$$\text{BDF6} \quad y_n = \frac{360}{147}y_{n-1} - \frac{450}{147}y_{n-2} + \frac{400}{147}y_{n-3} - \frac{225}{147}y_{n-4} + \frac{72}{147}y_{n-5} - \frac{10}{147}y_{n-6} + \frac{60}{147}hf(t_n, y_n)$$

Problema del priming: ricerca dei valori iniziali

- ▶ Stabilire i valori iniziali di una risoluzione per BDF non è banale.
- ▶ Se i valori non sono di accuratezza adeguata $O(h^p)$, il metodo non converge a ordine massimo.
- ▶ Esempio: BDF3. Non è possibile partire subito, mancano gli step precedenti. È d'obbligo fornire (calcolare) i valori precedenti con altri metodi.
- ▶ Metodi usati per i valori iniziali: RK, uso ricorsivo di metodi a passi precedenti
- ▶ Il passo di integrazione non può essere costante, ma deve essere esponenzialmente più piccolo nei passi precedenti per non perdere l'accuratezza

Zero stabilità e convergenza

- La zero stabilità per BDF (ed in generale metodi LM) deve essere analizzata per ogni ordine del metodo.

Proviamo a dare qualche definizione.

- Si dice **zero stabile** se è in grado di risolvere correttamente $y' = 0$, cioè per una perturbazione del calcolo all'interno del metodo, la soluzione non diverge

Facciamo un semplice esempio (non zero stabile):

$$u_{n+1} = 5u_n + u_{n-1} \text{ con } f = 0$$

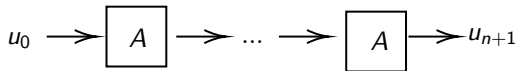
$$\begin{pmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_n \\ u_{n-1} \end{pmatrix}$$

$$\vec{u}_n = A u_{n-1} = A A u_{n-2} = A^{n+1} \vec{u}_0$$

$A = U^{-1} \Lambda U$ con Λ matrice contenente gli **autovalori associati al metodo**

$$A A = (U^{-1} \Lambda U)(U^{-1} \Lambda U) = U^{-1} \Lambda (U U^{-1}) \Lambda U = U^{-1} \Lambda \Lambda U$$

$$A^{n+1} = U^{-1} \Lambda^{n+1} U$$



Zero stabilità e convergenza (II)

- ▶ **Se gli autovalori hanno modulo > 1** , al passo n-esimo A^{n+1} avrà coefficienti enormi.
Nel nostro caso, gli autovalori sono 0.19258 e 5.19258
- ▶ Al ventesimo passo, la A^{n+1} sarà:

$$\begin{bmatrix} 1.958 * 10^{14} & 0.377 * 10^{14} \\ 0.377 * 10^{14} & 0.0726 * 10^{14} \end{bmatrix}$$

Qualsiasi perturbazione introdotta (anche nei valori iniziali) **farà divergere il metodo per qualsiasi sistema sotto analisi.**

- ▶ Autovalori di BDF2 (zero stabile): 1 e 1/3

Zero stabilità e convergenza (III)

Concludendo: il metodo è **zero stabile** se tutte le radici ξ_i (autovalori associati al metodo) del polinomio caratteristico $\rho(\xi)$ soddisfano $|\xi_i| \leq 1$, in cui

$$\rho(\xi) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \xi^{k-j}$$

Ordine e consistenza

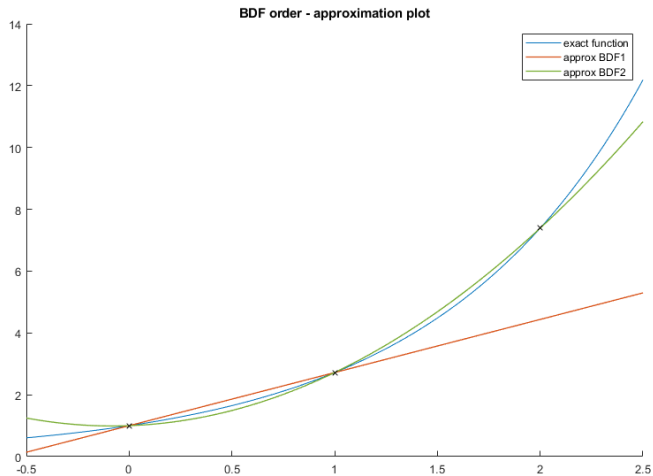
- ▶ Per i metodi LM questa operazione risulta particolarmente semplice.
- ▶ Come visto a lezione per il caso Eulero all'indietro, analizziamo l'errore di troncamento e vediamo se è trascurabile rispetto a h^p .
- ▶ Si dice che il metodo ha ordine p se l'errore di troncamento locale $d_n = O(h^p)$.
- ▶ Si dice che un metodo è consistente se $\rho(1) = 0$ e $\rho'(1) = \sigma(1)$ in cui:

$$\rho(\xi) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \xi^{k-j}$$

$$\sigma(\xi) = \beta_0 \xi$$

- ▶ diamo un'infarinatura intuitiva sull'ordine di convergenza:

Ordine e consistenza (II)



Assoluta stabilità

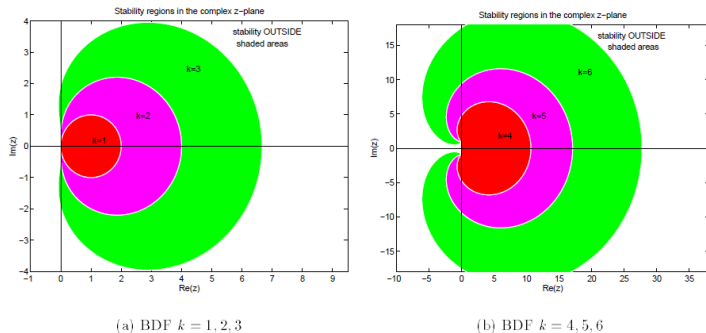


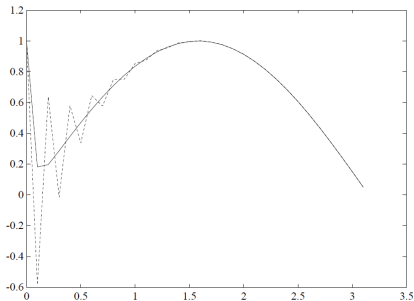
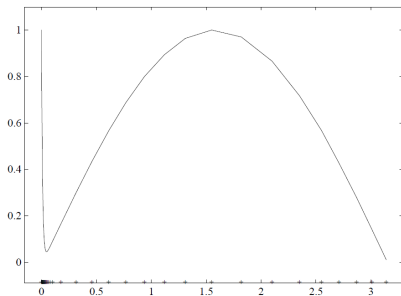
Figure 5.6: BDF absolute stability regions. The stability regions are outside the shaded area for each method.

Per i **multistep** si analizza la regione di NON stabilità

- ▶ Siamo già familiari con la zona di non stabilità di BDF1
- ▶ Da BDF3 la risoluzione può eccitare dei modi instabili in $\text{Re} < 0$ che faranno **divergere** la soluzione
- ▶ Da BDF7 si **perde la zero-stabilità**

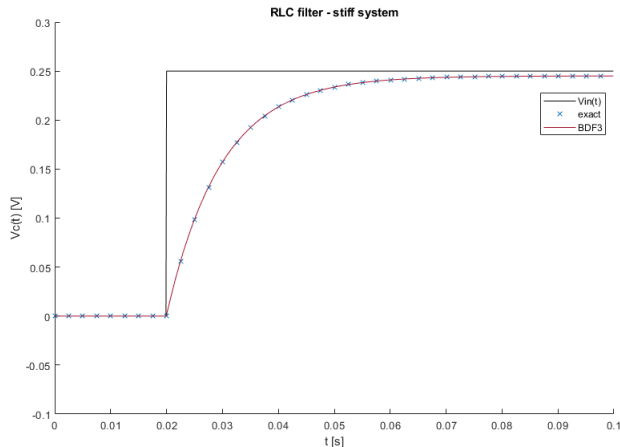
Stiff Decay

- ▶ È un **indice** che rivela quanto un metodo di risoluzione sia veloce nell'asestarsi alla soluzione di un sistema stiff.
- ▶ I metodi con *stiff decay* **trascurano la parte della soluzione che varia velocemente** senza perdere dettagli nella parte a bassa velocità.
- ▶ I metodi BDF hanno proprietà di stiff decay



Linea tratteggiata → **Crank-Nicholson** Linea continua → **BDF1**

Circuito RLC: soluzioni con BDF



- **Eulero esplicito** $\rightarrow 50 * 10^3$ passi necessari
- **BDF3** $\rightarrow 1 * 10^3$ passi necessari (tempo di risoluzione $< 1s$)